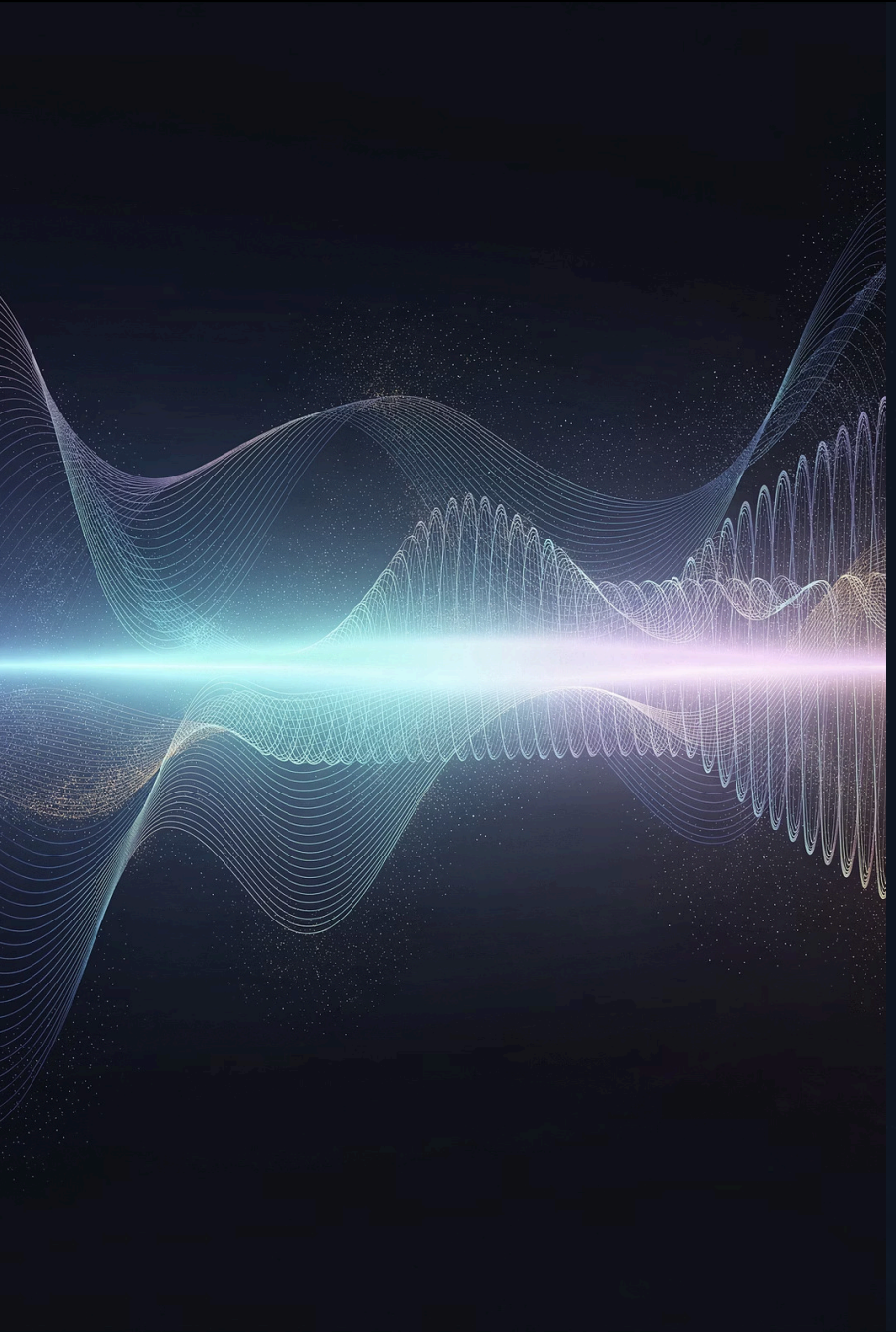
Işık ve Maddenin Dansı: UV Spektroskopisi

Ders Sunumu

Teradigma



Algının Sınırları: Elektromanyetik Spektrum

İnsan gözü, evrenin enerji okyanusunda yalnızca çok dar bir aralığı — görünür bölgeyi (400–750 nm) — algılayabilir.

UV-Vis Aralığı

190–800 nm aralığını inceler

Ultraviyole Bölge

190–400 nm: yüksek enerjili, gözle görülemeyen ışınlar

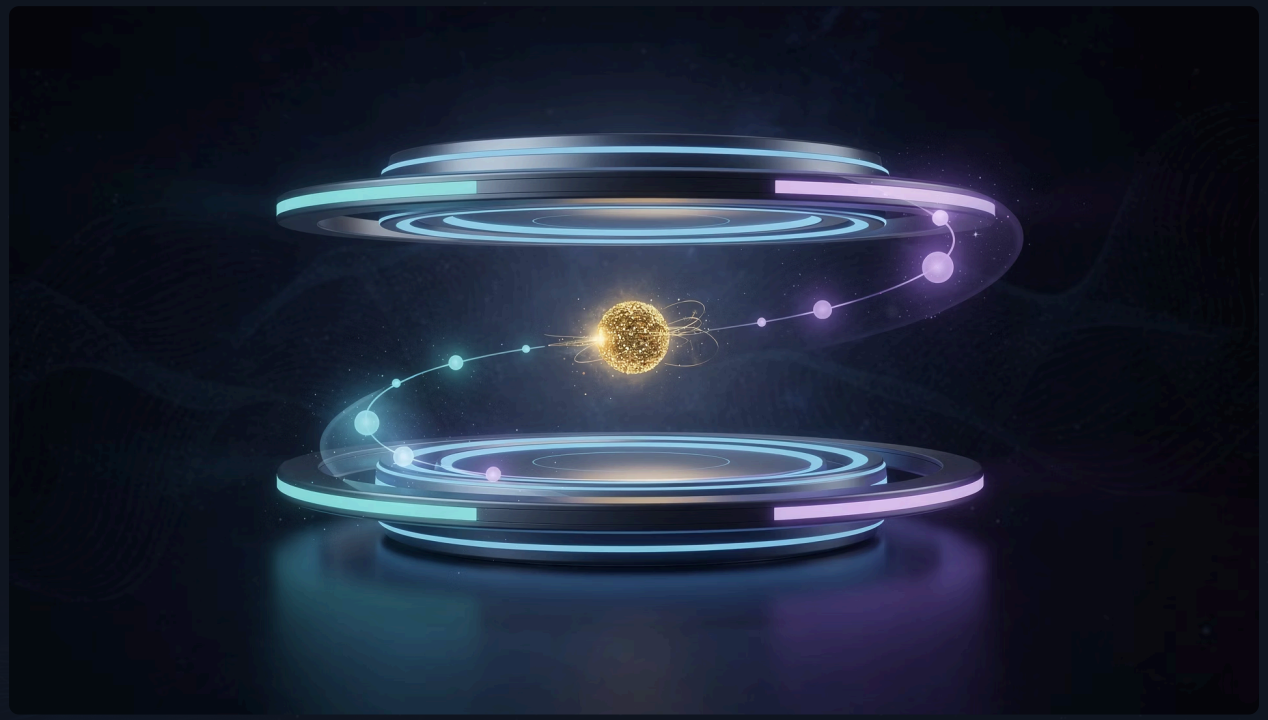
Görünür Bölge

400–750 nm: renklerin kaynağı

> Madde, ışıkla "rastgele" değil — yalnızca belirli enerji paketçiklerini (kuantize) soğurarak etkileşime girer.

Bohr Frekans Koşulu: Anahtar-Kilit Uyumu

Bir fotonun soğurulabilmesi için enerjisinin, molekülün iki enerji seviyesi arasındaki farka tam olarak eşit olması zorunludur:



$$\Delta E = E_{\text{uyarılmış}} - E_{\text{temel}} = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

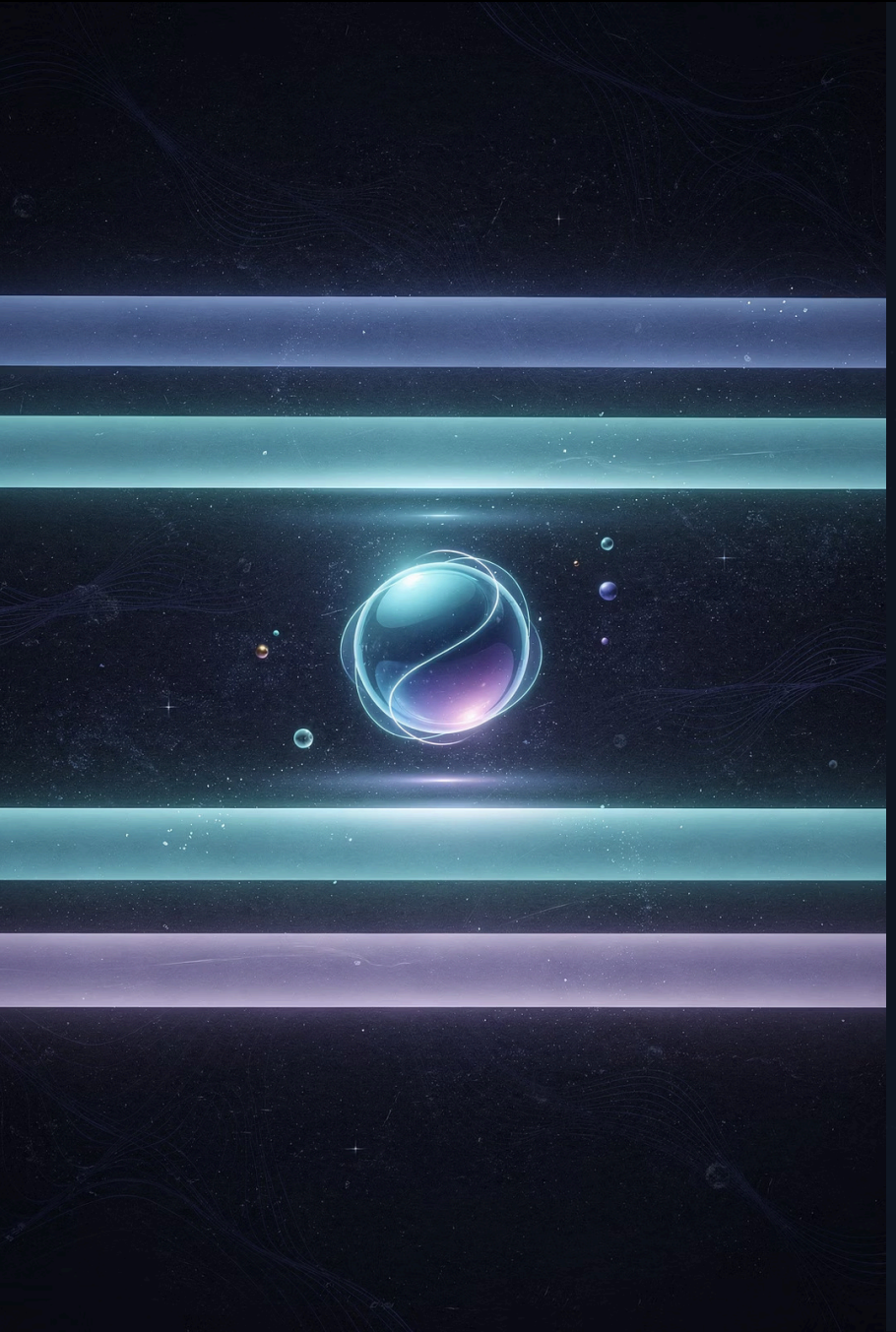
> Enerji seviyeleri sürekli olsaydı ve madde her enerjiyi rastgele soğursaydı, renklerin, şeffaflığın ve optik özelliklerin olmadığı kaotik bir evren olurdu. Enerji paketçiklerinin tam bu şekilde tasarlanmış olması, suyun şeffaf ve yaprağın yeşil olmasını mümkün kılmıştır.

h, ν, c, λ

h: Planck sabiti, ν: frekans, c: ışık hızı, λ: dalga boyu

Moleküler Parmak İzi

Her molekülün enerji basamakları kimyasal yapısına özgüdür — bir tür "parmak izi"



Moleküler Orbitaller: Elektronların Enerji Basamakları

Işık soğurulduğunda elektronlar, dolu orbitalden (HOMO) boş orbitale (LUMO) geçiş yapar.

1

σ → σ*

Çok yüksek enerji gerektirir; vakum UV (<150 nm); metan gibi kararlı moleküllerde

2

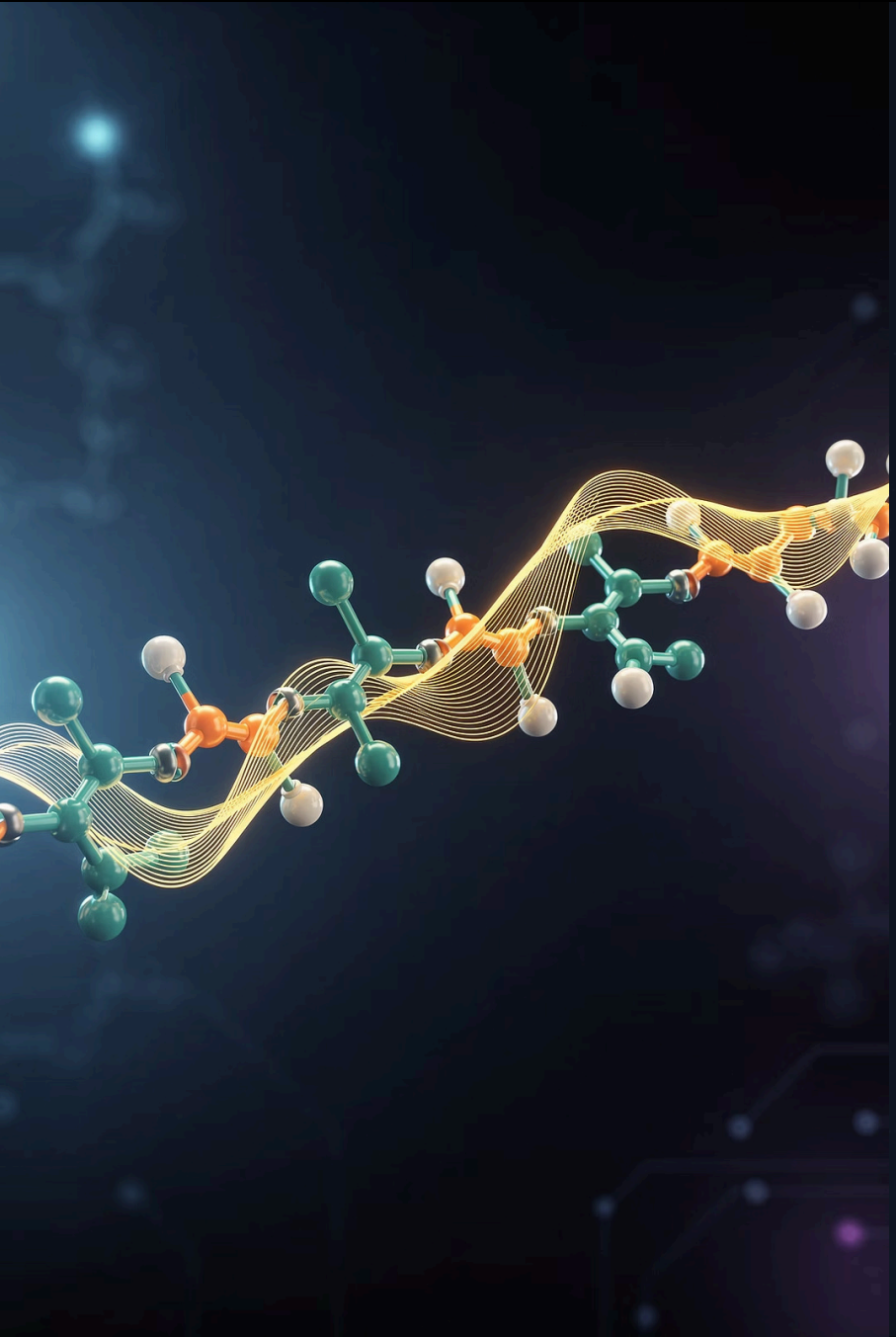
n → σ*

Orta-yüksek enerji; 150–250 nm; su, alkoller, aminler

3

π → π* ve n → π*

UV-Vis'in asıl ilgi alanı; 200–700 nm; alkenler, aromatikler, DNA bazları



Konjugasyon ve Renklerin Dili

Bir molekülde tek ve çift bağların ardışık sıralanması (konjugasyon), π elektronlarının molekül üzerinde serbestçe dolaşmasına (delokalizasyon) izin verir.

Hareket Alanı Genişler

HOMO-LUMO enerji farkı azalır

Batokromik Kayma

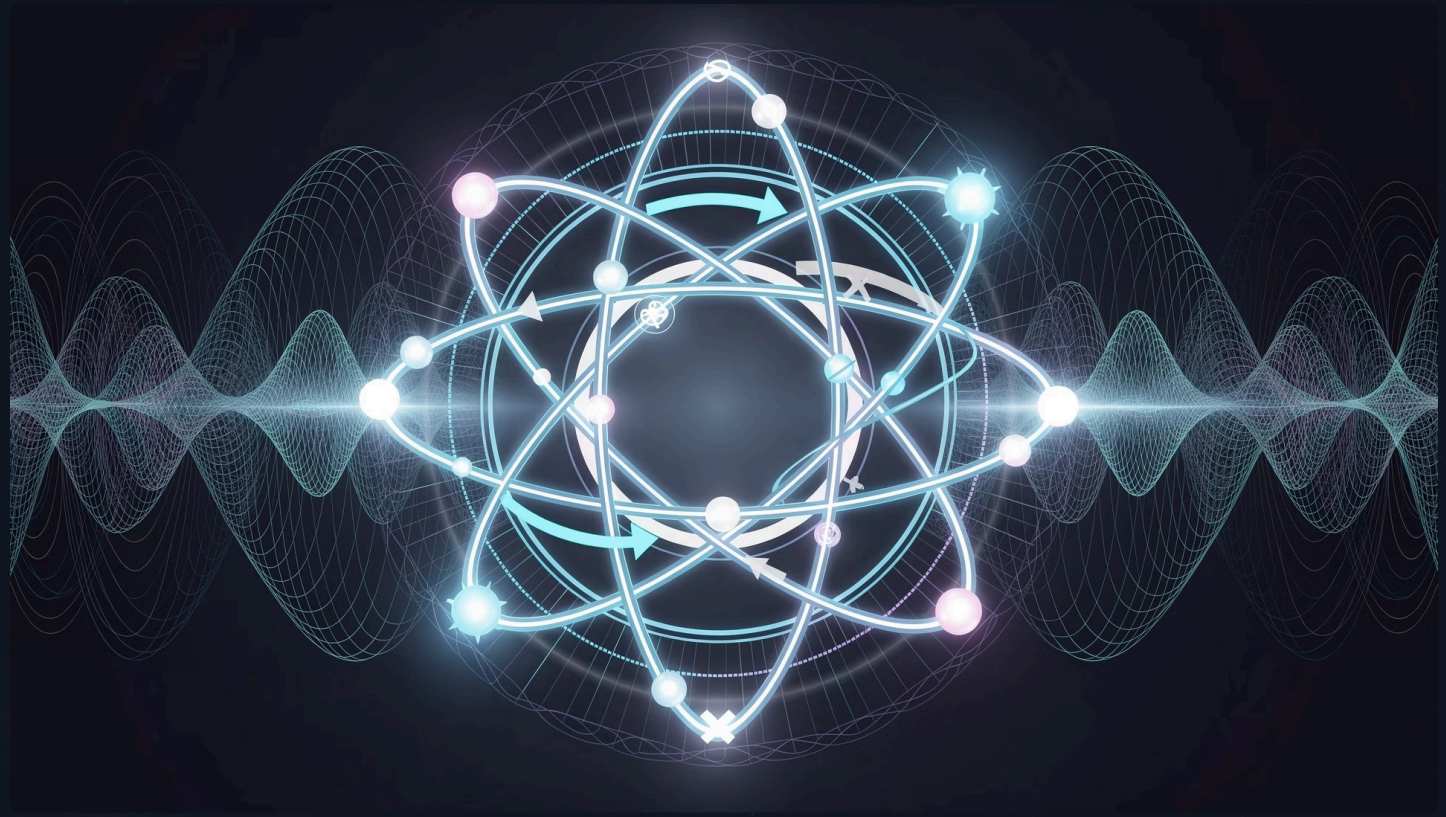
Enerji farkı azaldıkça soğurulan dalga boyu uzar — kırmızıya kayma

Renk Örneği

Beta-karoten turuncu, likopen kırmızı görünür — elektronların enerji basamaklarındaki konumlanışı bunu belirler

Seçim Kuralları: Evrensel Yasaklar ve İzinler

Hangi geçişlerin gerçekleşip gerçekleşmeyeceği, katı kurallarla belirlenmiştir.



> Bu yasaklar, maddenin sınırsızca enerji soğurup yaymasını engeller; kararlı yapıların oluşmasına zemin hazırlar. "Yasak", bir engel değil — nizamın koruyucusudur.

Spin Seçim Kuralı (ΔS = 0)

Singlet'ten triplet hale doğrudan geçiş yasaktır; bu yasağın kısmen esnimesi "fosforesans"ı (karanlıkta parlama) mümkün kılar

Laporte Kuralı

Simetri merkezine sahip moleküllerde aynı orbital türü arasındaki geçişler (d → d gibi) yasaktır; moleküler titreşimler bu kuralı esnetir ve geçiş metallerinin renkli görünmesini sağlar

Beer-Lambert Yasası: Nicel Analizin Temeli

Bir çözeltiden geçen ışığın şiddetindeki azalma ile madde miktarı arasındaki ilişki matematiksel olarak ifade edilmiştir:

$$A = \varepsilon \cdot c \cdot l$$

A — Absorbans

Işığın ne kadarının soğurulduğunun ölçüsü; $A = \log(I_0/I)$

ε — Molar Absorptivite

Maddeye özgü, elektronik yapının belirlediği katsayı

c — Derişim

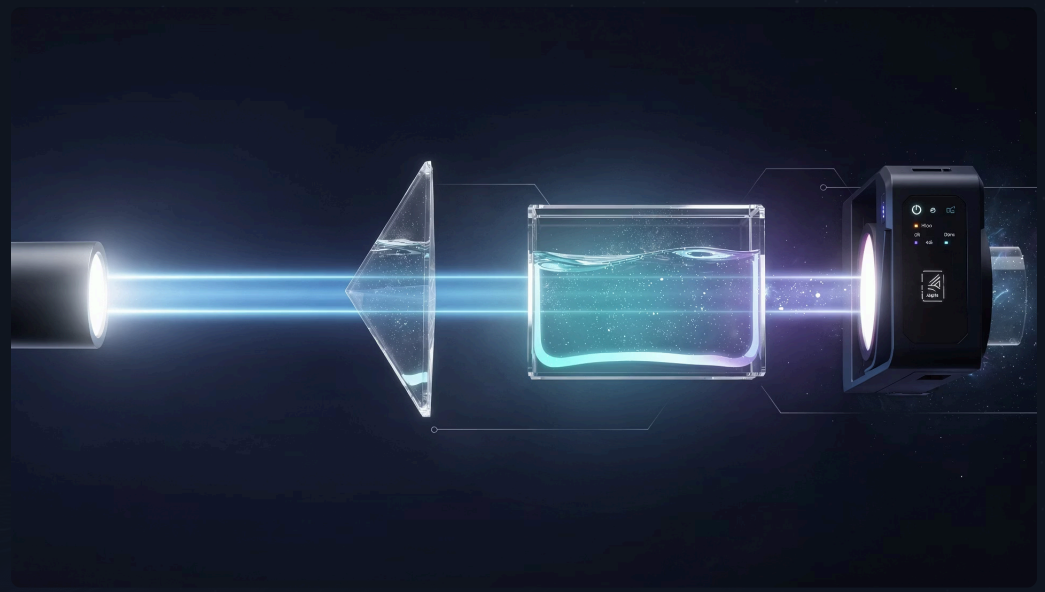
mol/L cinsinden çözelti konsantrasyonu

l — Işık Yolu

Genellikle 1 cm uzunluğundaki küvet

Spektrofotometre: Görünmeyeni Gösteren Cihaz

Dört temel bileşenden oluşur:



Işık Kaynağı

Döteryum lambası (UV) ve tungsten lambası (görünür bölge)

Monokromatör

Işığı bileşenlerine ayırır; numuneye yalnızca tek dalga boyu gönderir

Numune Haznesi

Işığın, küvet içindeki maddeyle buluştuğu bölüm

Dedektör

Geçen ışığı elektrik sinyaline dönüştürür (fotodiyot veya fotomultiplier tüpü)

DNA'nın Fotostabilitesi: Ultra-Hızlı İç Dönüşüm

DNA, 260 nm civarında UV ışığını güçlü biçimde soğurur — bu enerji, normal koşullarda kimyasal bağları kırabilir. Ancak nükleobazlar bu enerjiyi "iç dönüşüm" (internal conversion) adı verilen mekanizmayla bertaraf eder:

Femtosaniye Hızı

Soğurulan enerji, femtosaniyeler (10^{-15} saniye) içinde zararsız ısı titreşimlerine dönüştürülür

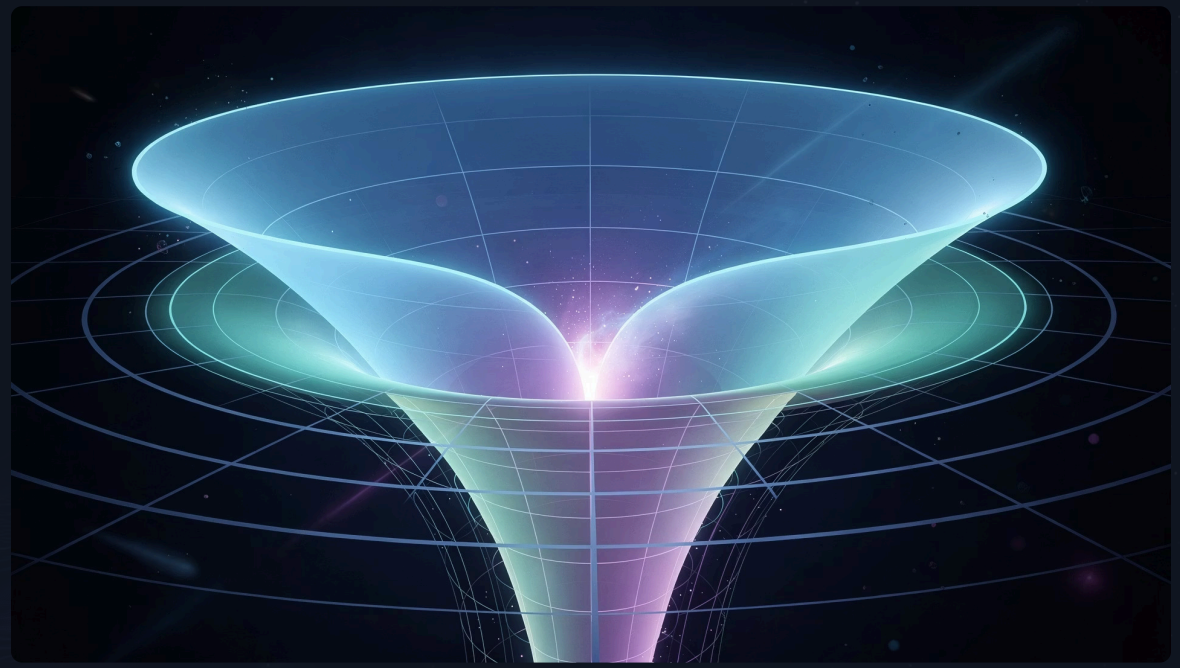
Fotokimyasal Koruma

Bu hız, molekülün zararlı bir fotokimyasal reaksiyona girmesine fırsat tanımaz

> Eğer nükleobazların enerji seviyeleri çok az farklı olsaydı, güneş ışığı altında DNA hızla mutasyona uğrayarak parçalanacaktı. Bu moleküller, yalnızca bilgi saklamakla kalmaz — o bilgiyi koruyacak donanımla birlikte tasarlanmıştır.

Konik Kesişimler: Enerji Kaydırakları

İç dönüşümün bu denli hızlı işlemesi, potansiyel enerji yüzeylerindeki özel noktalara — **Konik Kesişimler (Conical Intersections)** — bağlıdır.



Konik Kesişim Nedir?

Uyarılmış hal ile temel halin enerjisinin değiştiği, huni biçimli özel nokta

Analoji: Enerji Kaydırağı

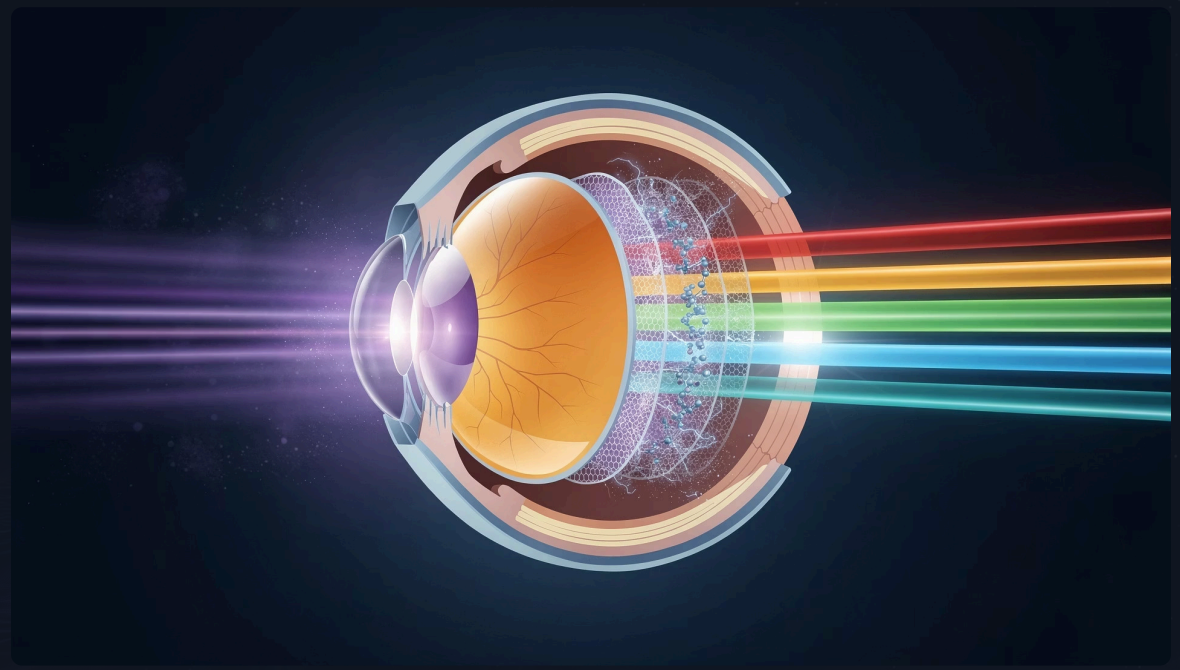
Yüksek kattan (uyarılmış hal) zemin kata (temel hal) inmek için merdiven yerine anında kayan bir kaydırak

Pürin ve Pirimidinler

Pürin bazları (Adenin, Guanin) bu kesişime neredeyse bariyersiz ulaşır; pirimidinlerde süreç biraz daha karmaşıktır, ancak yine de son derece etkilidir

Gözdeki Kimyasal Filtre: Kynurenine Yolu

Triptofan amino asidinin metabolik parçalanmasıyla gözün merceğinde (lensinde) özel filtre molekülleri oluşturulur: **Kynurenine (Kyn)** ve **3-Hidroksikynurenine (3-OHK)**.



Seçici Soğurma

300–400 nm aralığındaki UV-A ve UV-B ışınlarını güçlü biçimde soğururlar

Görünür Işığı Geçirme

400 nm sonrasını (mavi, yeşil, kırmızı) neredeyse hiç soğurmazlar — görme kalitesi bozulmaz

Enerji Dönüşümü

Soğurulan enerji, zararsız ısıya dönüştürülerek yok edilir

Katarakt: Filtre Sisteminin Bozulması

Yaşlanmayla birlikte lens içindeki antioksidan denge bozulduğunda filtre molekülleri okside olur.

1

Oksidatif Bozulma

Okside olmuş filtreler, koruyucu işlevini yitirir

2

Protein Hasarı

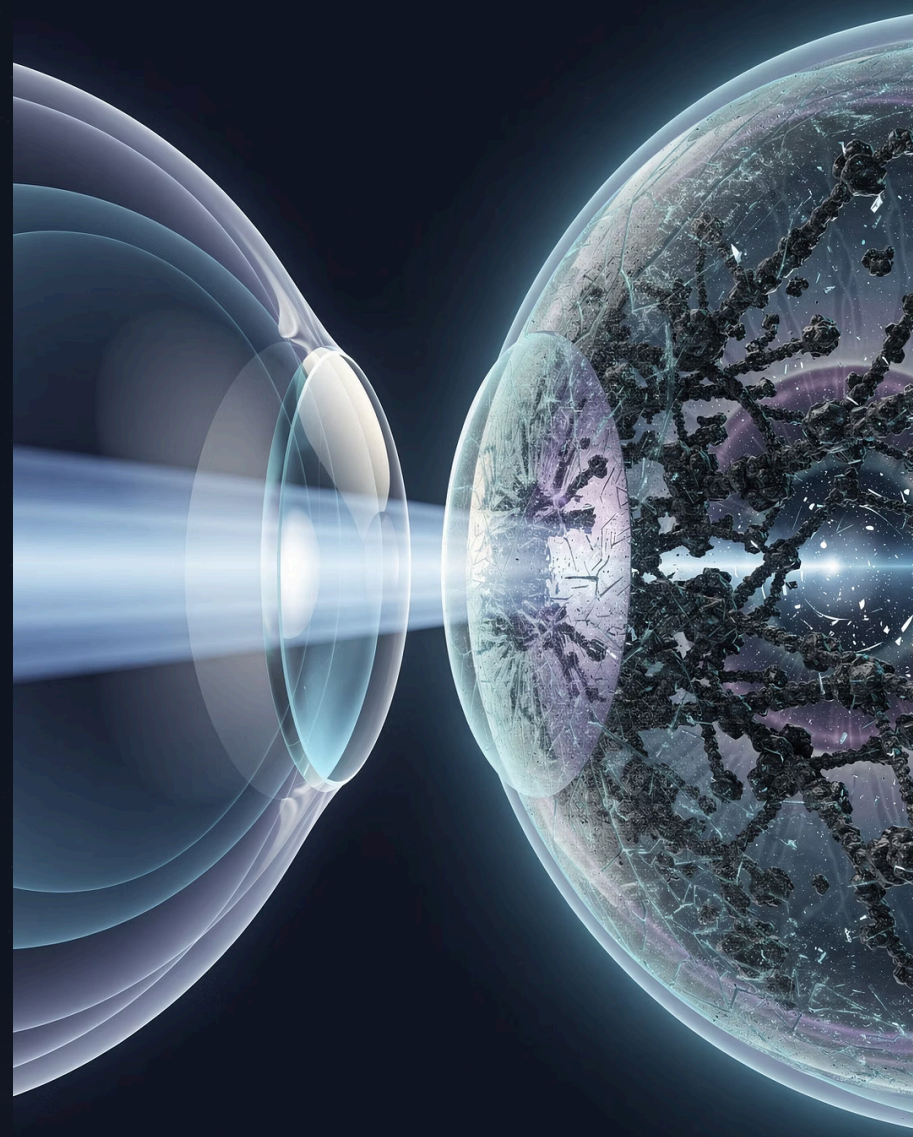
Lens proteinlerine (kristalinlere) yapışan zararlı maddelere dönüşürler

3

Katarakt

Lensin şeffaflığını yitirmesi

> Kör ve şuursuz atomların, "gözün görmesi gerektiğini ve UV'nin zararlı olduğunu" bilerek böyle bir filtre sistemi kurması düşünülemez. Bu sistem, varlığı bir bütün olarak kuşatan bir İlmin eseridir.



DermaSensor: Işıkla Kanser Teşhisi

2024'te FDA tarafından "Çığır Açan Cihaz" statüsüyle onaylanan **DermaSensor**, elastik saçılma spektroskopisi (ESS) kullanır.

Elastik Saçılma

Işığın enerjisi değişmez, yalnızca yönü değişir

Işık Darbeleri

Cihazın probu, şüpheli lezyona 300–900 nm aralığında ışık darbeleri gönderir

Doku Farkı

Sağlıklı ve kanserli dokunun farklı hücresel yapıları, ışığı farklı açı ve yoğunluklarda saçar

FDA ONAYLI — 2024

DermaSensor: Spektral Parmak İzinden Karara

Saçılan ışık toplanarak bir spektrum (doku parmak izi) elde edilir; yapay zeka bu spektrumu binlerce doğrulanmış kanser verisiyle karşılaştırarak saniyeler içinde risk skoru üretir.

DermaSensor: Klinik Başarı

96.67%

Melanom Tespiti

Melanom tespitinde hassasiyet

97.22%

BCC ve SCC

BCC ve SCC tespitinde hassasiyet

Negatif öngörü değeri çok yüksek — cihaz "temiz" derse gereksiz biyopsiden kaçınılabilir

Mikroplastik Tespiti: Görünmez Kirlilik

Gözle görülmesi zor mikroplastikler (5 mm'den küçük), toprak ve su ekosistemlerini tehdit eder. UV-Vis ve özellikle NIR (Yakın Kızılötesi) spektroskopisi, bu parçacıkları kimyasal bağlarından tanır.

PE — Polietilen

C-H ve C-C bağı bantları

PVC — Polivinil Klorür

C-Cl bağı bantları

PP — Polipropilen

CH_3 grubuna ait bantlar

Kemometri: Gürültüden Anlam Çıkarmak

Toprak numunesi organik maddeler, kil ve su içerdiği için çok karmaşık bir spektrum verir.

PLSR Modeli

Kısmi En Küçük Kareler Regresyonu: Bilinen plastik konsantrasyonlarıyla eğitilmiş modeller kullanır

Yüksek Doğruluk

Bilinmeyen numunedeki plastik türü ve miktarı %98'e varan doğrulukla ($R^2 > 0.98$) tahmin edilebilir

Arazi Taraması

Geniş arazilerin hızla taranması ve kirlilik haritası çıkarılması mümkün olur

Eserden Müessire: Hammadde ve Sanat

Özdeş Tuğlalar

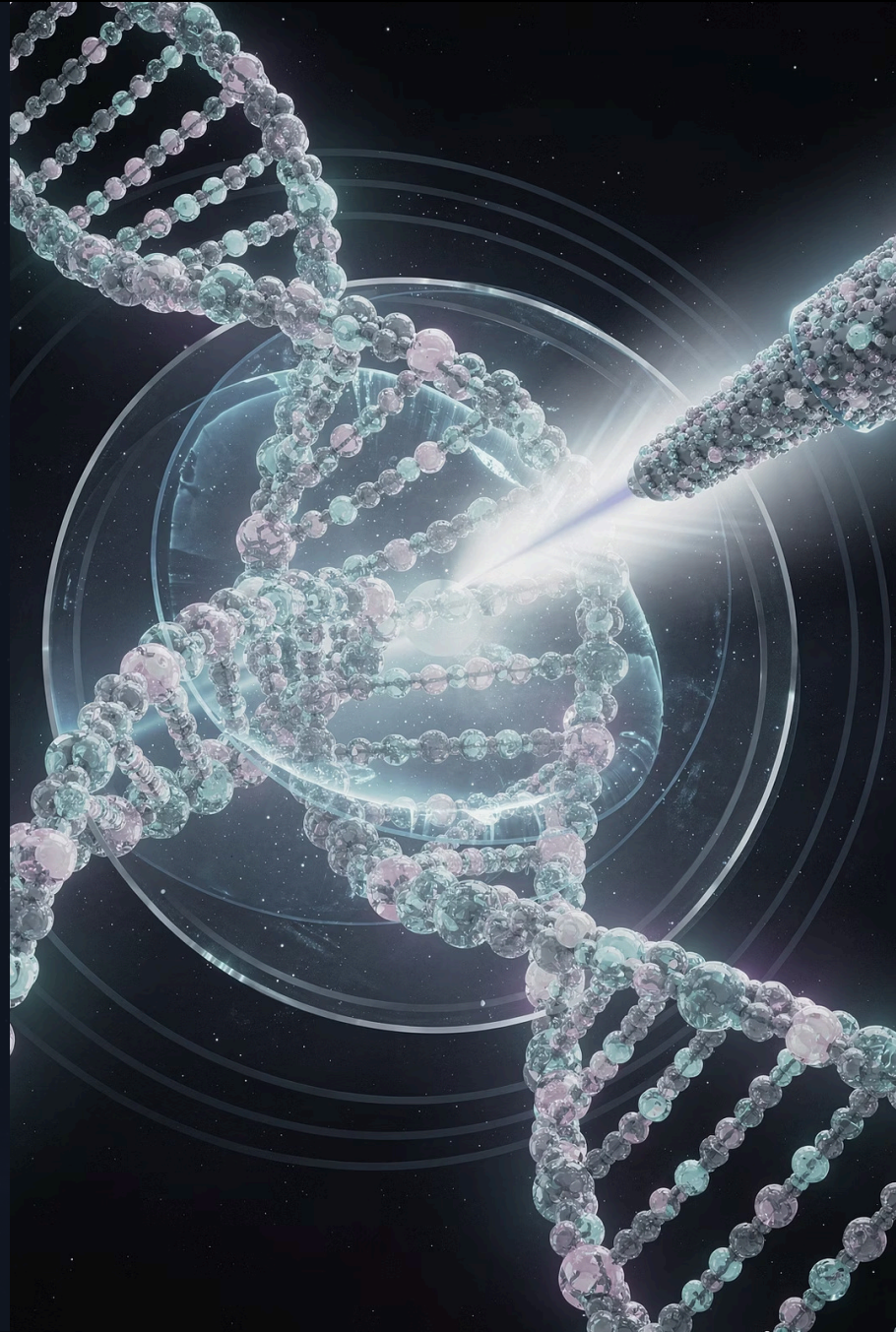
Evrendeki tüm elektronlar, protonlar ve karbon atomları özdeş — standart "fabrikasyon" tuğlalar gibidirler

Farklı İşlevler

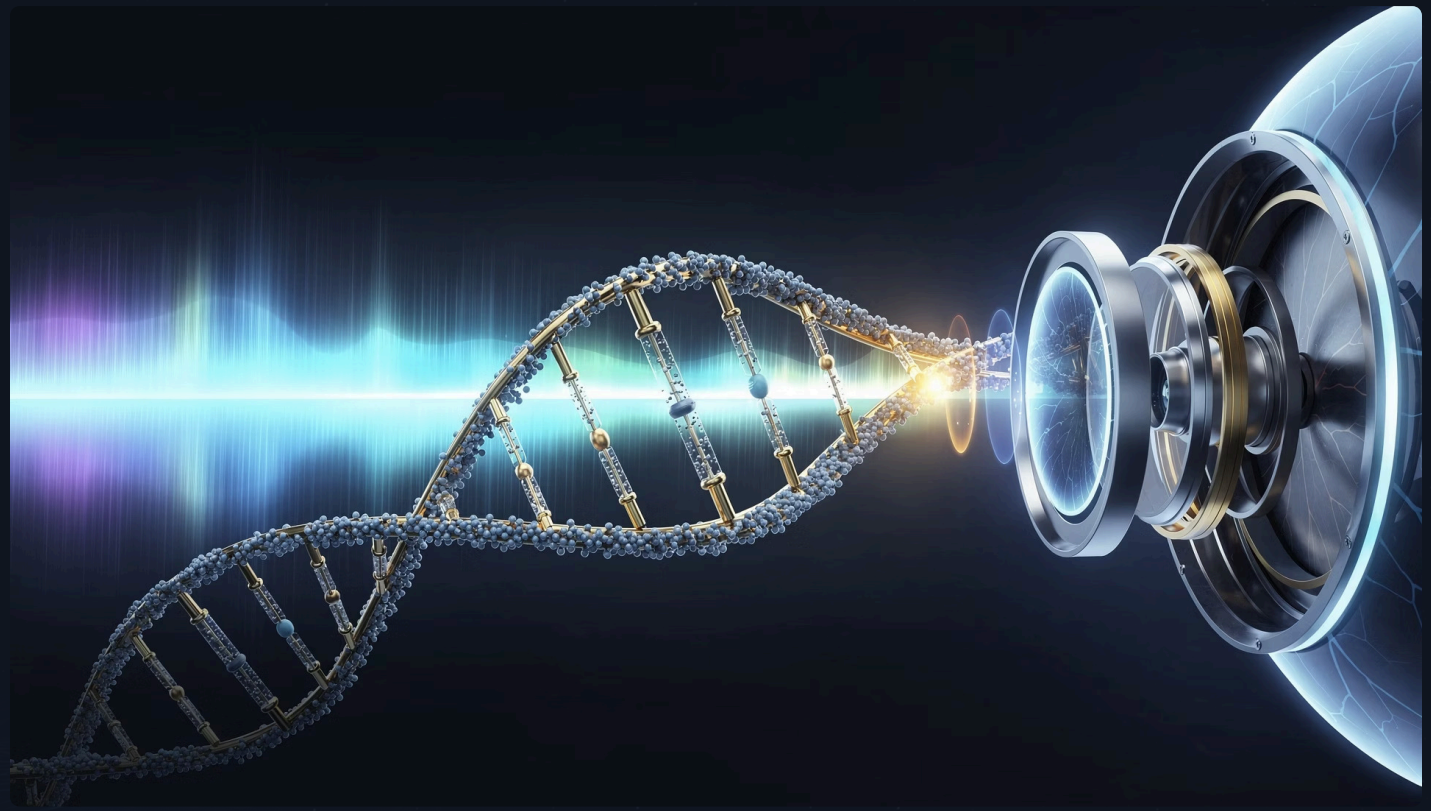
Bu tuğlalar DNA'da bir fotostabilite kalkanı, gözde bir UV filtresi, DermaSensor'un probunda ise kanser uyarı sinyali oluşturmaktadır

Belirme (Emergence)

Parçaların toplamında bulunmayan özelliklerin birleşimde "belirmesi", bu özelliklerin parçaların dizilişindeki **Nizam'a** ait olduğunu gösterir



İnce Ayar: Denk Gelmeler Tesadüf mü?



Madde, kendi başına "gelecekte gözün göreceğini" bilip ona göre bir filtre geliştiremez. Bu öngörü, ancak zamanın ve mekanın ötesinde bir İlmin eseri olabilir.

DNA ve Güneş Spektrumu

DNA'nın enerji aralığı (ΔE), güneşin yaydığı UV spektrumuyla örtüşecek biçimde tasarlanmıştır; konik kesişimler bu aralıkta çalışır

Gözdeki Hassas Filtre

Gözdeki kynurenine molekülleri tam 300–400 nm arasını soğurur — görünür ışığı değil

Bağımsız Değil, Planlı

Bu "denk gelmeler" birbirinden bağımsız değil; her biri, yaşamı destekleme gayesi taşıyan bir planın parçasıdır

Kanun Fail Değildir

Bilimsel anlatımda sıkça kullanılan "Atom kararlı olmak ister", "Doğa seçer", "Moleküller birbirini tanır" ifadeleri ontolojik bir yanılgı riski taşır.

Beer-Lambert Yasası Ne Yapar?

Işığın soğurulmasını *yapan* güç değil — olayın *nasıl* olduğunu tarif eden formüldür

Trafik Kanunu Analojisi

Trafik kanunu arabayı sürmez; benzer şekilde fiziksel yasalar da maddeye irade atfetmez

Mutlak İtaat

Madde bu kanunlara mutlak bir itaatle uyar; bu itaat, evrendeki muazzam nizamın sürmesini sağlar

Sentez: UV Spektroskopisi Ne Anlatır?

DNA Fotostabilitesi

Konik kesişimler ve iç dönüşüm mekanizması, yaşamın sürekliliğini güvence altına alır

Gözdeki Kynurenine Filtreleri

Tam olarak zarar verebilecek dalga boylarını bloke eder, görünür ışığı geçirir

Beer-Lambert Yasası

Maddenin ışıkla ilişkisi matematiksel bir kesinliğe sahiptir; DermaSensor ve ilaç analizleri buna dayanır

Mikroplastik Tespiti

Aynı prensipler çevresel tehditleri görünür kılar

> Spektrofotometrenin ekranındaki her pik, maddenin en küçük parçasından en büyük sistemine kadar tesadüfe yer bırakmayan hassas bir nizam ve sanatın işaretidir.